

 winmostar チュートリアル

# Quantum ESPRESSO フォノン計算(DFPT法)

V11.12.0

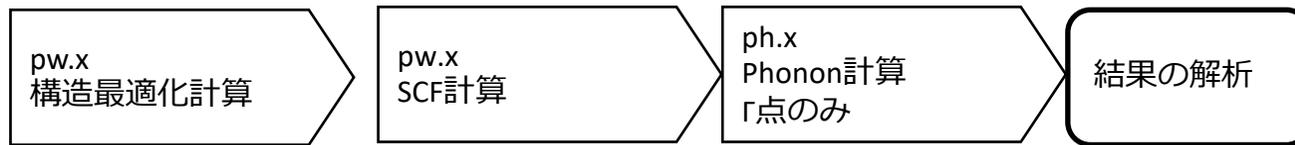
2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ

# 本書について

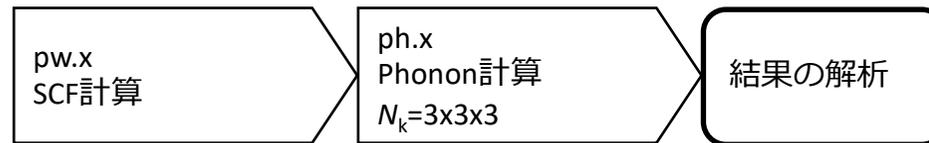
- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

# 概要

- DFPT法によるラマンスペクトル計算がGGA汎関数、Ultrasoft擬ポテンシャルに対応していないため、LDA汎関数、NCPP（ノルム保存擬ポテンシャル）で構造最適化計算を行った上で、フォノン計算からSi結晶のIR、ラマンスペクトルを取得します。



- フォノン計算からSi結晶のフォノンバンド、フォノンDOSを取得します。



## 注意点：

- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギー、smearing幅は計算結果に影響を与えます。特にフォノン計算は構造の影響を強く受けます。構造最適化計算で適切な構造を得るために、初期構造、擬ポテンシャル及び各種パラメータを慎重に選ぶ必要があります。
- k点の経路（パス）は対象とする結晶構造に応じて設定し直す必要があります。各結晶構造における推奨のパスはQEのインストールディレクトリにあるdoc¥brillouin\_zones.pdfを参考に設定してください。
- ◆ Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳細な説明は、次の弊社記事をご覧ください。  
[https://qiita.com/xa\\_member](https://qiita.com/xa_member)

# 動作環境設定

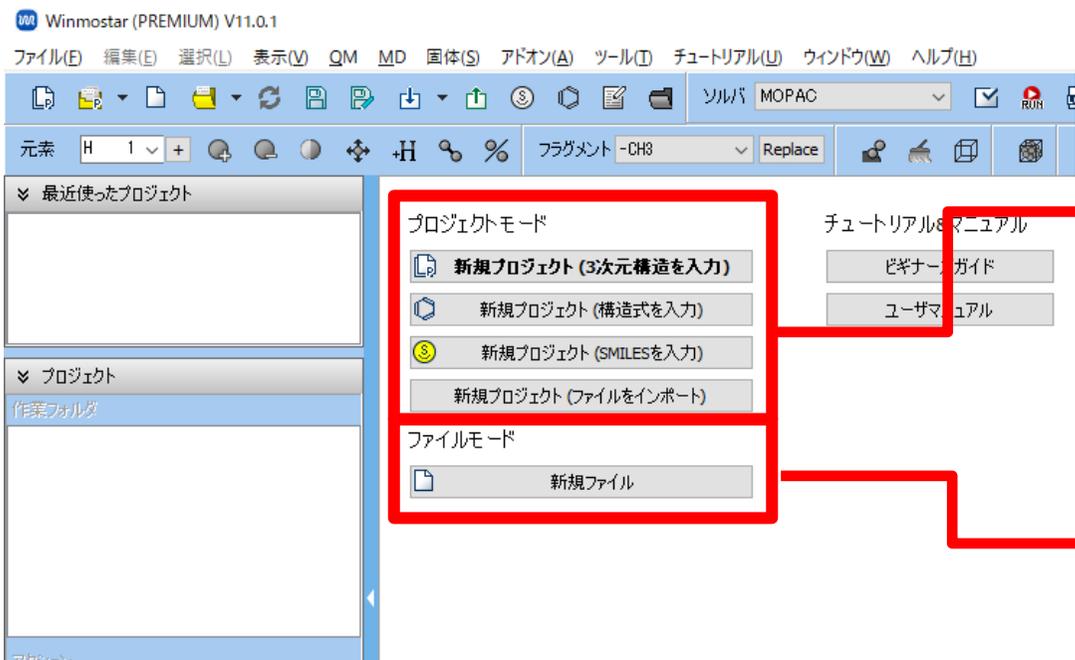
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途[Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定](#)が必要です。

# Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。

本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

ファイルモードの操作方法は[V10のQuantum ESPRESSOチュートリアル](#)を参照してください。



## プロジェクトモード **V11新機能**

ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

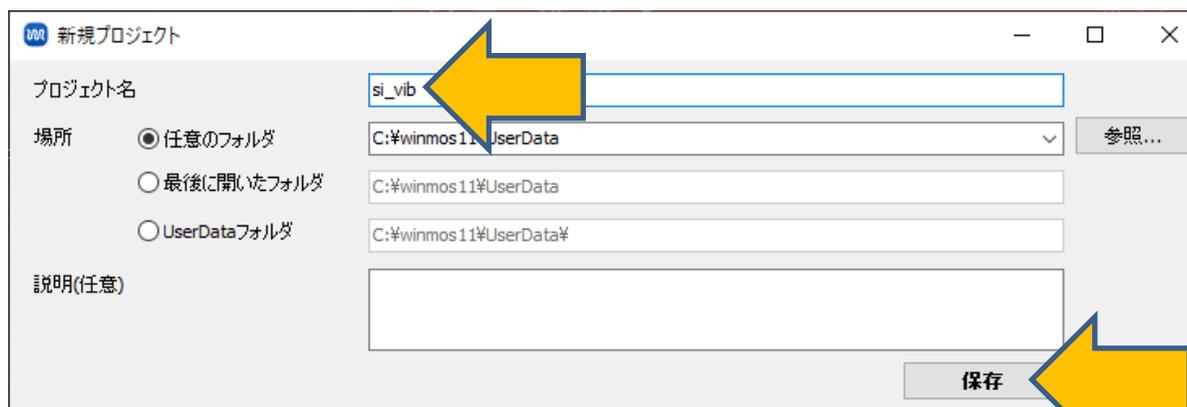
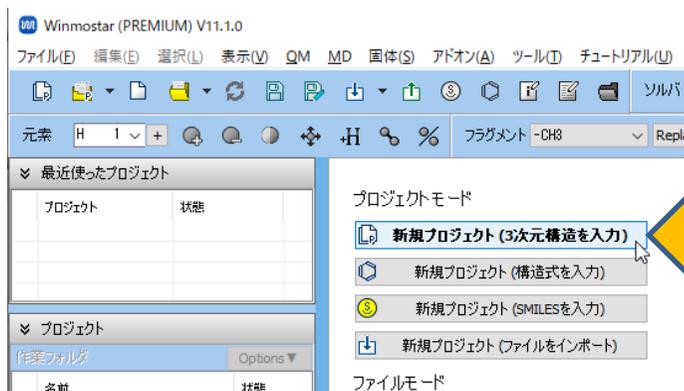
## ファイルモード

ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

# I. 系のモデリング

基本的な操作方法は[QE基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト（3次元構造を入力）**をクリックします。（すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる**をクリックします。）
2. **プロジェクト名**に「si\_vib」と入力し**保存**をクリックします。



# I. 系のモデリング

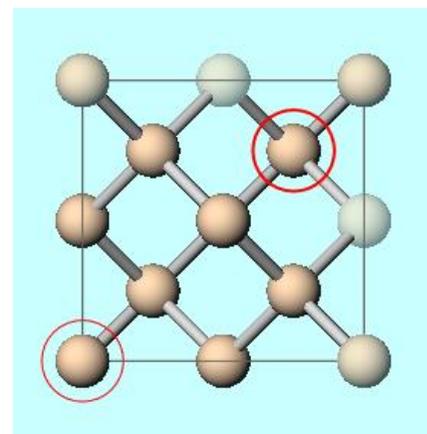
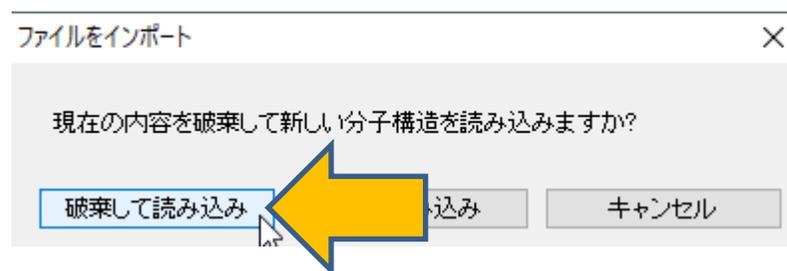
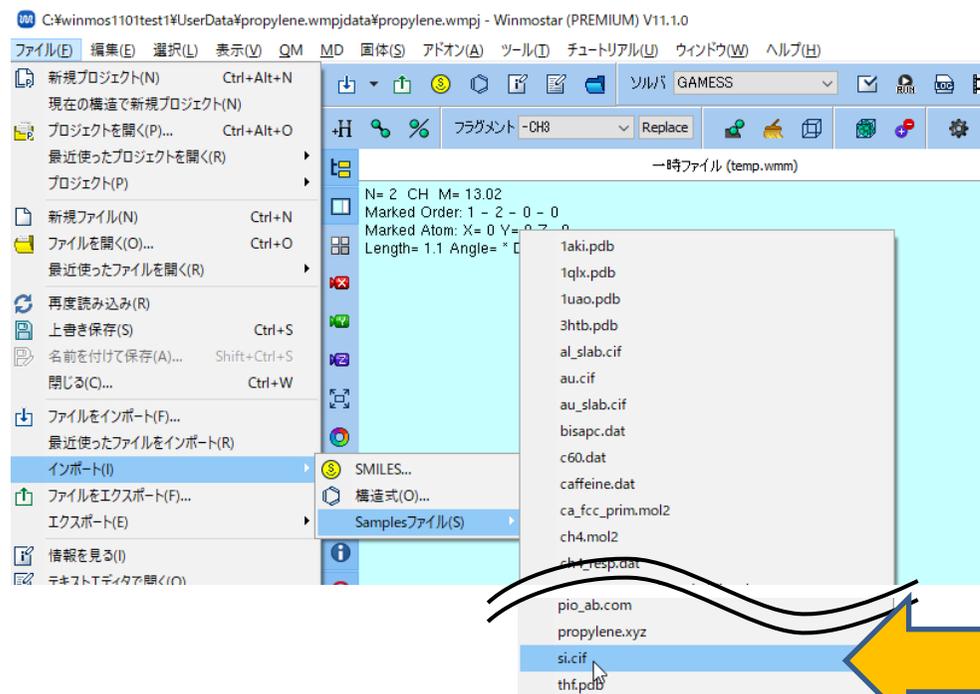
初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル | si.cif**をクリックします。

– 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。

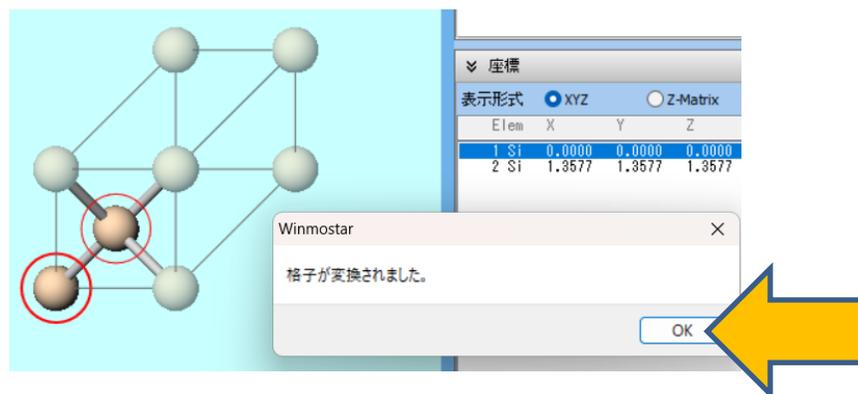
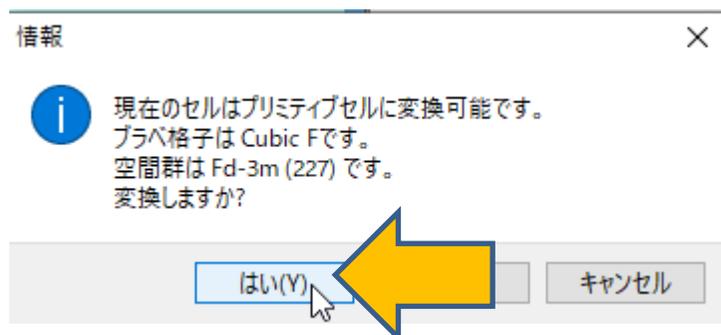
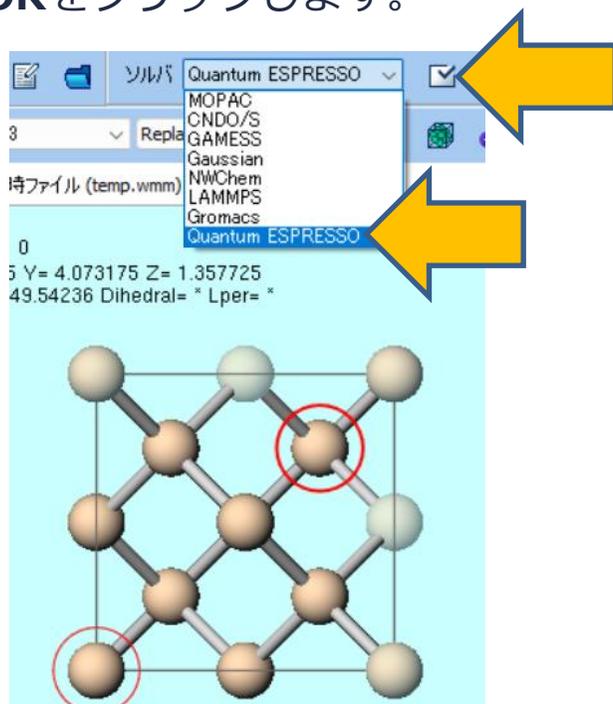
2. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。

3. 分子表示エリアに所望の構造が出現することを確認します。



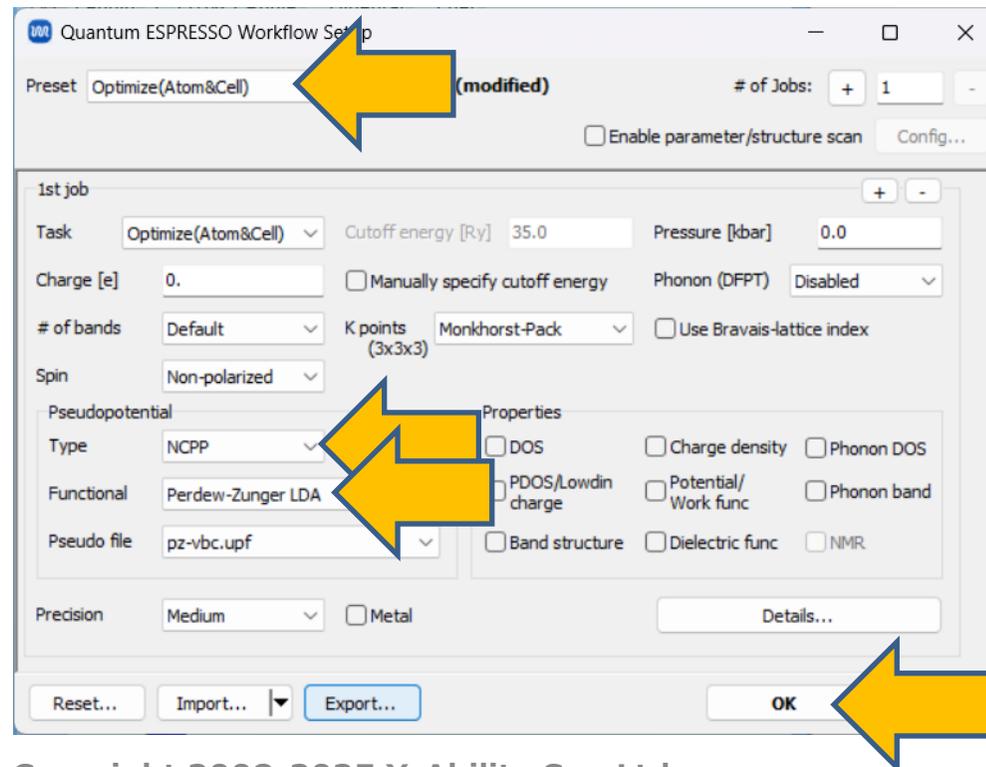
## II. 計算の実行 構造最適化

1. ツールバーのソルバから**Quantum ESPRESSO**を選択します。
2.  **(ワークフロー設定)** をクリックします。
3. 計算時間を短縮するため、プリミティブセルに変換するか聞かれたら**はい**をクリックします。分子表示エリアには変換後の構造が出現します。「格子が変換されました」と表示されたら**OK**をクリックします。



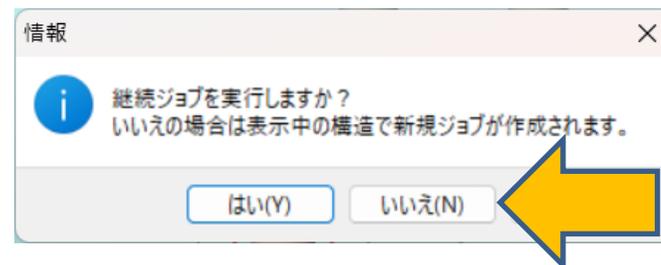
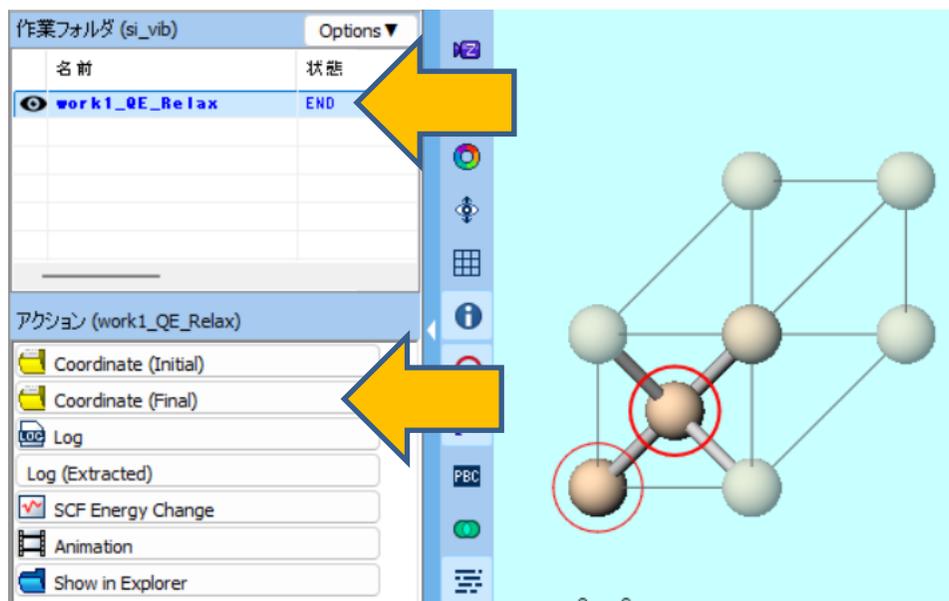
## II. 計算の実行 構造最適化

1. PresetをOptimize(Atom&Cell)に変更します。
2. PseudopotentialのTypeをNCPP、 FunctionalをPerdew-Zunger LDAに変更します。  
(QEのph.exeによるラマンスペクトル計算がGGA、Ultrasoftに対応していないため)
  - (計算精度を落として計算を早く終了させたい場合はPrecisionを「Low」に変更します。)
3. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。



# III.計算の実行 IR・ラマンスペクトル

1. 作業フォルダでwork1\_QE\_Relaxの状態が**END (青)**に変化した後、作業フォルダでwork1\_QE\_Relaxをクリックしアクションで**Coordinate (Final)**をクリックし構造最適化後の構造を表示します。
2.  (ワークフロー設定) をクリックします。「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらいいえをクリックします。



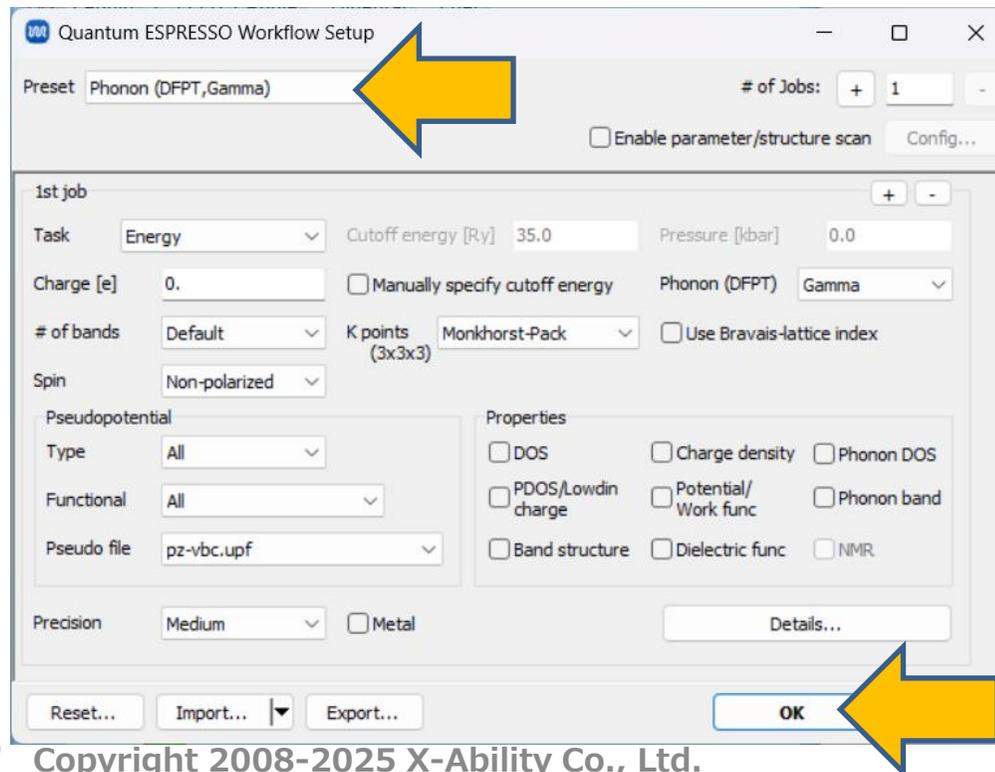
# III.計算の実行 IR・ラマンスペクトル

## 1. PresetをPhonon (DFPT, Gamma)に変更します。

- (計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**Precision**を「Low」に変更します。)

## 2. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。

- `ph.x`が対称性由来の異常終了を起こす場合は、構造最適化後の構造に対し**固体 | 対称性を考慮して結晶構造を調整**を実行してからフォノン計算を実行してください。



# IV.結果解析 IR・ラマンスペクトル

1. 計算が終了して作業フォルダの状態が**END（青）**に変化した後、**作業フォルダ**で **work2\_QE\_SCF**をクリックして、**アクション**で**IR/Raman**をクリックすると、IR・Raman スペクトルが表示されます。
2. **IR/Raman Spectrum**ウィンドウにおいて、可視化したいピークをクリックします。
3. **Animation**ボタンをクリックすると、振動モードのアニメーションが表示されます。

The screenshot illustrates the software workflow. On the left, the '作業フォルダ (si\_vib)' window shows a table of jobs. The 'work2\_QE\_SCF' job is highlighted in blue, and its status is 'END'. Below this, the 'アクション (work2\_QE\_SCF)' window shows a list of actions, with 'IR/Raman' selected. In the center, the 'IR/Raman Spectrum (si\_vib.wmpjdata/work2\_QE\_SCF/pw.pwout)' window displays a plot of intensity versus wavenumber (1/cm). A peak at 512.6 cm⁻¹ is selected, and its details are shown in the table below:

Peak No.	Wavenumber (1/cm)	Intensity	Other Data
1	0	0.000	0.000
2	0	0.000	0.000
3	0	0.000	0.000
4	513	0.0001126	
5	513	0.0001126	
6	513	0.0001126	

At the bottom of the spectrum window, the 'Animation' button is highlighted. On the right, the 'Winmostar Vi...' window shows a 3D visualization of the crystal structure with two atoms highlighted in orange, representing the vibrational mode corresponding to the selected peak.

# IV.結果解析 IR・ラマンスペクトル

1. アクションでLog (Phonon)をクリックし、フォノン計算のログファイルを開きます。
2. 誘電率は、最後に出現するDielectric constant in cartesian axisの後に表示されています。

※ K点分割数を上げることで実験値に近づきます。K点分割数の調整方法は[QE基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

```
Convergence has been achieved
```

```
Number of q in the star = 1
```

```
List of q in the star:
```

```
1 0.000000000 0.000000000 0.000000000
```

```
Dielectric constant in cartesian axis
```

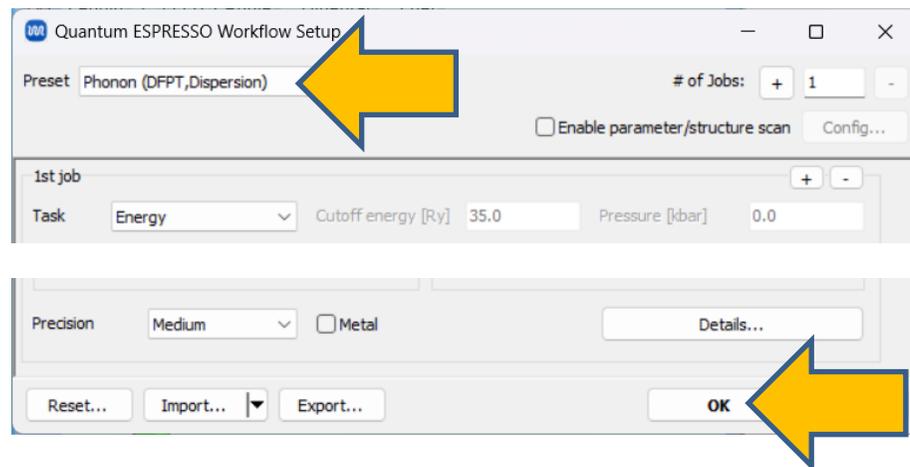
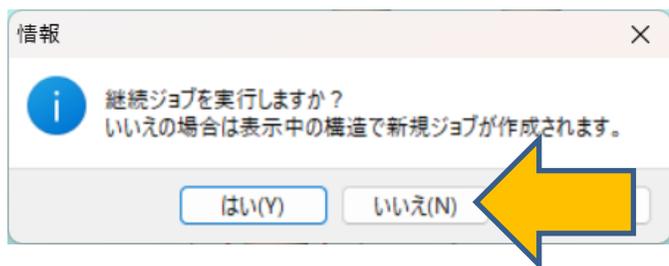
```
( 18.905618249 -0.000000000 -0.000000000 )
( -0.000000000 18.905618249 -0.000000000 )
( -0.000000000 -0.000000000 18.905618249 )
```

```
Effective charges (d Force / dE) in cartesian axis without
```

```
atom 1 SI Mean Z*: -0.61116
Ex ( -0.61116 0.00000 0.00000 )
Ey ( 0.00000 -0.61116 -0.00000 )
Ez ( 0.00000 0.00000 -0.61116 )
```

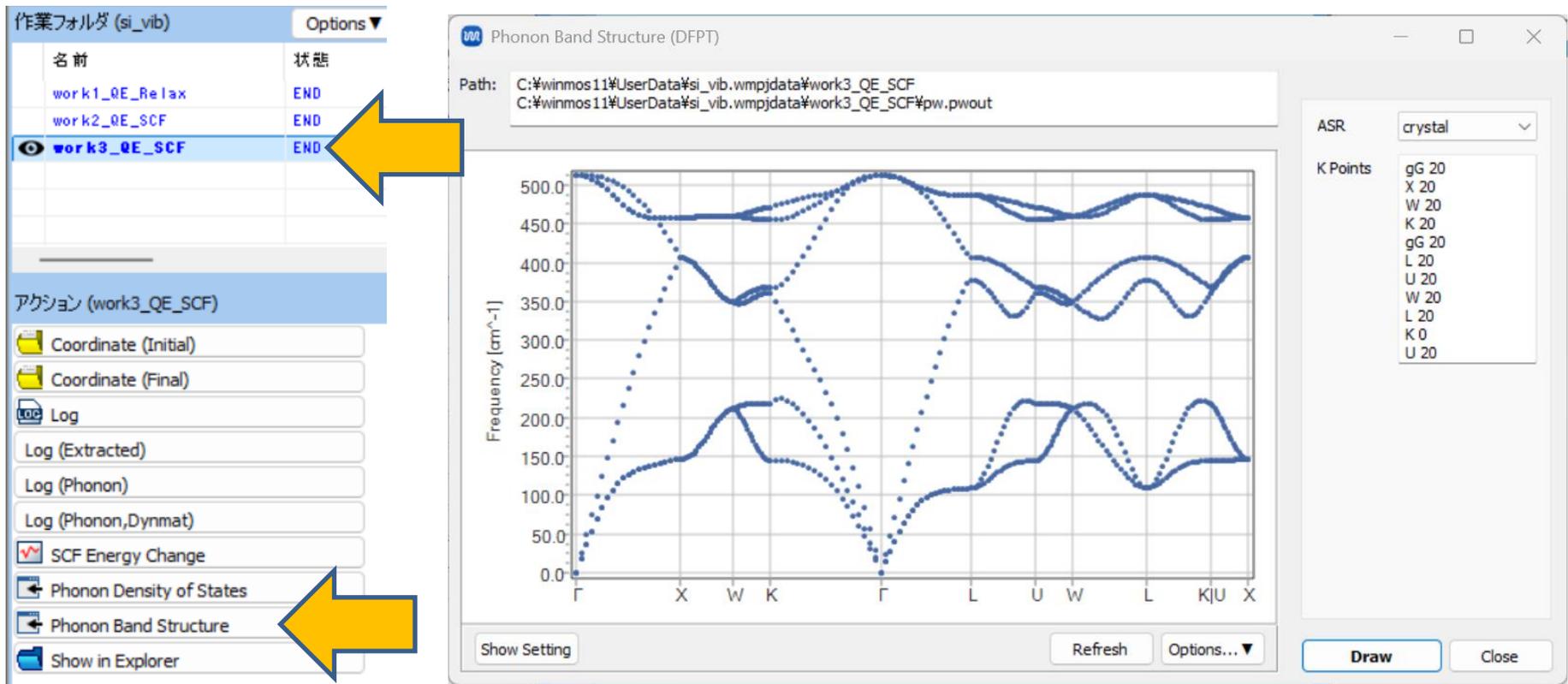
## V. 計算の実行 フォノン分散

1.  (ワークフロー設定)をクリックします。
2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
3. Quantum ESPRESSO Workflow Setupウィンドウで、Presetから**Phonon (DFPT, Dispersion)**を選択します。
  - (計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**Precision**を「Low」に変更します。)
4. **OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。
  - `ph.x`が対称性由来の異常終了を起こす場合は、構造最適化後の構造に対し**固体 | 対称性を考慮して結晶構造を調整**を実行してからフォノン計算を実行してください。



# VI. 結果解析 フォノン分散

1. 計算が終了して作業フォルダの状態が**END (青)**に変化した後、**作業フォルダ**で **work3\_QE\_SCF** をクリックして、**アクション** で **Phonon Band Structure** をクリックすると、Phonon Band Structure ウィンドウが出現し、フォノン分散曲線が得られます。
2. 確認後 **Close** をクリックします。



# VI. 結果解析 フォノン分散

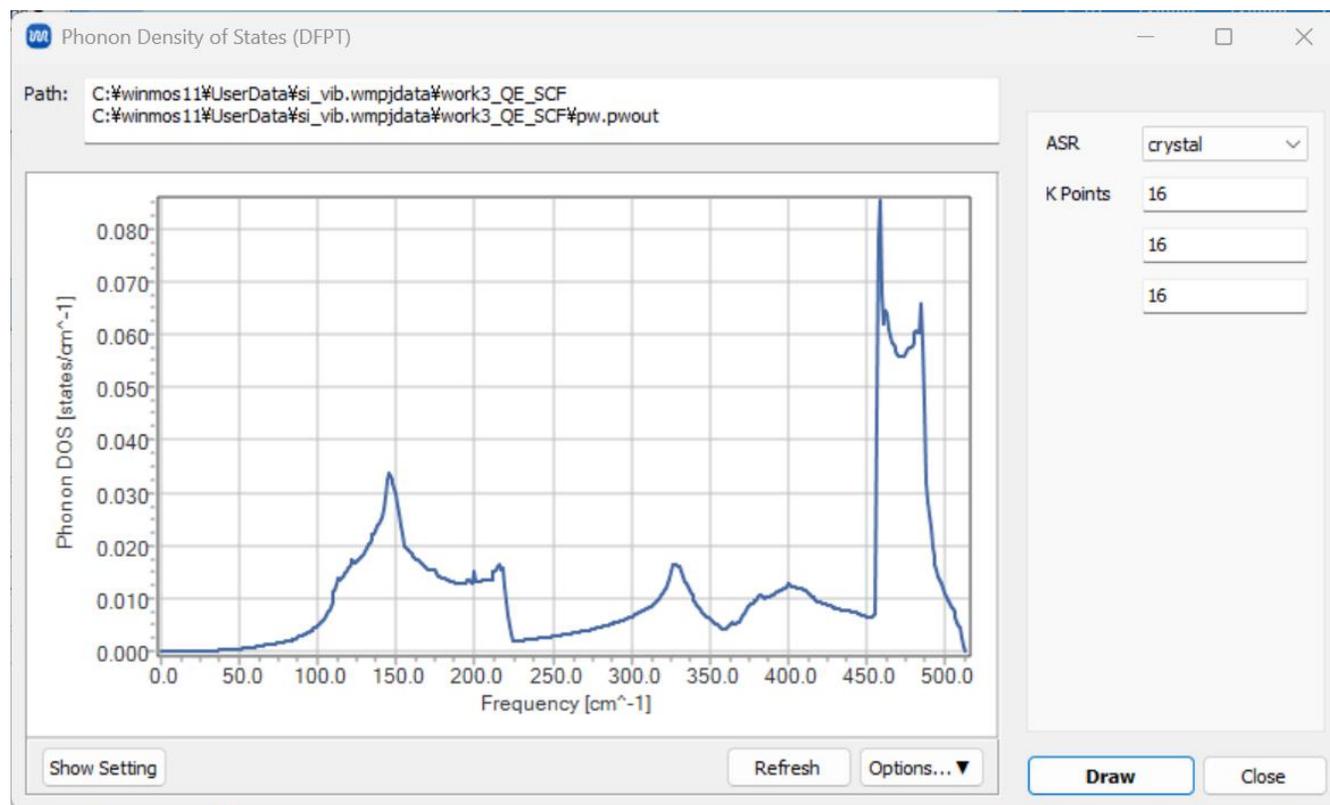
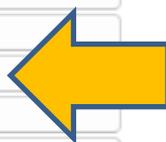
1. アクションで**Phonon Density of States**をクリックすると、Phonon Density of States ウィンドウが出現し、フォノン状態密度が得られます。
2. 確認後**Close**をクリックします。

作業フォルダ (si\_vib) Options ▼

名前	状態
work1_QE_Relax	END
work2_QE_SCF	END
<b>work3_QE_SCF</b>	END

アクション (work3\_QE\_SCF)

- Coordinate (Initial)
- Coordinate (Final)
- Log
- Log (Extracted)
- Log (Phonon)
- Log (Phonon,Dynmat)
- SCF Energy Change
- Phonon Density of States**
- Phonon Band Structure
- Show in Explorer



# 最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



## [ユーザマニュアル](#)



## [Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar 導入講習会](#)、[Winmostar 基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上